

LA-UR-

*Approved for public release;
distribution is unlimited.*

Title:

Author(s):

Submitted to:

Los Alamos

NATIONAL LABORATORY

Los Alamos National Laboratory, an affirmative action/equal opportunity employer, is operated by the University of California for the U.S. Department of Energy under contract W-7405-ENG-36. By acceptance of this article, the publisher recognizes that the U.S. Government retains a nonexclusive, royalty-free license to publish or reproduce the published form of this contribution, or to allow others to do so, for U.S. Government purposes. Los Alamos National Laboratory requests that the publisher identify this article as work performed under the auspices of the U.S. Department of Energy. Los Alamos National Laboratory strongly supports academic freedom and a researcher's right to publish; as an institution, however, the Laboratory does not endorse the viewpoint of a publication or guarantee its technical correctness.

Modèles, incertitudes et prises de décision pour l'ingénierie de systèmes en dynamique rapide

François M. Hemez^(a)

^(a)Los Alamos National Laboratory
Division of Engineering Sciences and Applications
ESA-WR, Mail Stop T006
Los Alamos, New Mexico 87545, United States
Email: hemez@lanl.gov — Web: www.esa.lanl.gov

Résumé

Les architectures informatiques actuelles et codes de modélisation permettent l'analyse de systèmes complexes qui intègrent couplages physiques et échelles multiples. Cette publication discute quelques uns des aspects introduits par de telles ressources en termes de quantification des incertitudes et validation des modèles. La discussion est illustrée par la simulation d'un test de Taylor utilisé pour établir la qualité prédictive d'un modèle de plasticité. La qualité du modèle est établie, y compris dans les régions où les tests physiques ne sont pas disponibles.

Publication approuvée pour diffusion publique et illimitée. LA-UR-02-7054. Unclassified.

1. Introduction

Les ressources informatiques actuellement disponibles commencent à rendre possible l'analyse de systèmes complexes qui intègrent couplages physiques et échelles multiples. Un exemple est le programme ASCI (*Advanced Scientific Computing*) du Département Américain de l'Energie qui développe des plates-formes capables de produire plus de 10^{+13} multiplications par seconde, soit 10 TERAOPS, en distribuant les calculs parmi plusieurs milliers de processeurs. Quelques exemples d'applications qui nécessitent l'accès à de telles ressources sont la prédiction des phénomènes climatiques à l'échelle de la planète, l'ingénierie de protéines, la dynamique moléculaire ainsi que de nombreuses applications en transport des particules et physique thermonucléaire.

L'approche qui consiste à développer des modèles de plus en plus complets d'un point de vue physique devient populaire au fur et à mesure que les ressources informatiques deviennent accessibles. Le Japon possède une machine capable de 38 TERAOPS, dédiée à l'étude de l'activité sismique planétaire et à ses effets sur des infrastructures critiques. Le Royaume Uni s'est récemment procuré cinq plates-formes capables de plus de 3 TERAOPS chacune. Le laboratoire du Département de l'Energie à Los Alamos teste actuellement une machine capable de 30 TERAOPS, qui pourra fournir 200 TERAOPS dans quelques années. Enfin, IBM vient de s'engager dans une initiative pour développer

une technologie capable de délivrer un PENTAFLOP, c'est-à-dire 1.000 TERAOPS, d'ici l'année 2006.

Lorsque cette technologie est appliquée à des problèmes en sciences de l'ingénieur, on observe généralement que, au lieu de remplacer les expériences physiques, l'approche TERAOPS tend plutôt à changer la nature des tests nécessaires. Les expériences physiques évoluent depuis des tests de prototypage et de qualification vers des tests de validation. L'objectif d'un test de validation est de quantifier les incertitudes associées aux modèles mathématiques et numériques ainsi que de valider le degré de fidélité des lois physiques implémentées. Un corollaire important est la détermination du domaine de validation, c'est-à-dire le domaine à l'intérieur duquel un modèle peut être utilisé avec un degré de confiance suffisant vis-à-vis d'une application particulière.

Cette publication illustre deux besoins introduits par le calcul TERAOPS en sciences de l'ingénieur. La propagation des incertitudes et la validation des modèles sont discutées. La perspective de l'auteur est celle d'un utilisateur des machines et codes de calcul, et non pas celle d'un informaticien, ni d'un mathématicien appliqué. Les détails des procédures peuvent être trouvés dans plusieurs références citées. Une discussion récente de la philosophie de la validation de modèles est disponible dans la Référence [1].

2. Le Test d'Impact Taylor

Le test de Taylor consiste à impacter, pour des conditions variables de vitesse et de température, un échantillon de matériel contre une surface rigide. Des déformations importantes (plus de 260%), des élévations significatives de température, ainsi que des déformations plastiques résultent de l'impact. Les mesures du profil déformé permettent de calibrer les équations d'état et modèles constitutifs en prenant en compte l'effet de la température et du taux de déformation [2]. Les lois constitutives ainsi calibrées peuvent être implémentées dans des codes de calcul des structures ou des codes hydrodynamiques Euleriens qui simulent des phénomènes d'impact et de pénétration.

La Figure 1 illustre les résultats mesurés et simulés d'un impact de Taylor pour un acier de haute performance. Le code de calcul utilisé pour cette illustration est la version explicite de HKS/AbaqusTM [3], qui permet de modéliser les phénomènes de contact et d'impact pour systèmes arbitrairement non-linéaires. Le modèle de plasticité implémenté est celui de Zerilli-Amstrong [2,4] qui est décrit par l'équation de contrainte-déformation:

$$\sigma = C_0 + C_1 e^{-C_3 T + C_4 T \log\left(\frac{d e_p}{dt}\right)} + C_5 e_p^N \quad (1)$$

où le symbole T représente la température et e_p signifie déformation plastique. Les six paramètres C_0 , C_1 , C_3 , C_4 , C_5 et N sont des constantes qui dépendent du matériau et qui peuvent être calibrées pour améliorer la fidélité du modèle. Par la suite, la variable S_R est aussi utilisée pour représenter le logarithme (en base 10) du taux de déformation.

Le domaine opérationnel, pour lequel un modèle de plasticité est développé, possède deux dimensions comme le montre l'illustration en Figure 2. L'une des dimensions est la température T , la seconde est la vitesse de déformation S_R . Chacune peut varier dans un intervalle particulier (voir la Figure 2) et la question principale est de quantifier la précision du modèle de plasticité à l'intérieur de ce domaine. Le domaine est par la suite appelé domaine opérationnel ou domaine de validation. Les sept points représentent les configurations $(T; S_R)$ pour lesquelles des échantillons sont testés et mesurés.

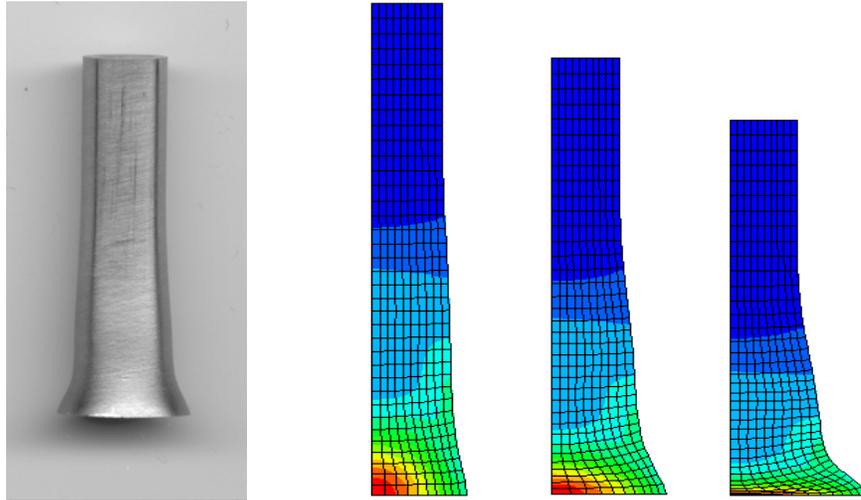


Figure 1 – Corrélation calculs-essais pour la simulation d'un impact de Taylor.
(Gauche: Profil mesuré. Droite: Profils simulés à 17 ms, 33 ms, et 50 ms après impact.)

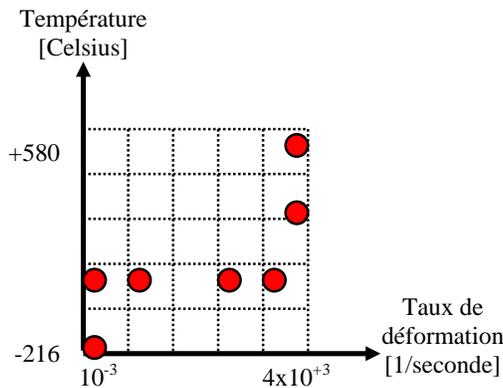


Figure 2 – Définition du domaine de validation.

Il est important pour la suite de ne pas confondre les six variables ($C_0; C_1; C_3; C_4; C_5; N$) avec les deux paramètres ($T; S_R$) qui définissent le domaine de validation. La différence principale entre les deux est que les variables de calibration sont introduites par le choix d'un modèle particulier de plasticité. Qu'un autre modèle soit choisi, et il est probable que les variables de calibration changeront. Cependant, un modèle de plasticité, quel qu'il soit, doit toujours être vérifié pour différentes combinaisons de températures T et taux S_R . Les quantités ($C_0; C_1; C_3; C_4; C_5; N$) sont dénommées «variables» car leur connaissance est sujette à une incertitude importante. Cette incertitude peut faire l'objet d'une modélisation probabiliste, ce qui est proposé par la suite. Les quantités ($T; S_R$), quant à elles, sont des «paramètres» qui définissent les conditions d'utilisation du modèle.

3. Propagation Inverse des Incertitudes Expérimentales

La calibration des paramètres d'un modèle est une technique souvent employée afin d'améliorer la qualité prédictive. Dans le contexte de la propagation d'incertitude où il est reconnu que certains paramètres du modèle, ainsi que les réponses que l'on essaie de prédire, sont des variables aléatoires, la calibration devient un exercice de propagation inverse d'incertitude. Bien que de nombreuses formulations soient possibles, cette discussion s'intéresse plus particulièrement à la formulation de Bayes [5].

Le point de départ est, comme dans tout problème d'optimisation, la formulation d'une fonction coût. Comme les variables $p=(C_0;C_1;C_3;C_4;C_5;N)$ du modèle et les réponses y sont des quantités aléatoires, la fonction coût devient un test statistique. La formulation de Bayes stipule que la fonction coût est la probabilité des variables p conditionnée par les mesures expérimentales y^{Test} . La loi de probabilité a postériori est définie comme:

$$e^2 = -2 \log (\mathbf{Prob} (p | y^{Test})) \quad (2)$$

Le théorème de Bayes exprime la loi de probabilité a postériori e comme le produit d'une fonction de vraisemblance et de la loi de probabilité a priori des variables p . La vraisemblance est la probabilité de prédire les mesures y^{Test} étant donné le modèle décrit par les paramètres p . Sous l'hypothèse de lois de probabilités Gaussiennes, la fonction de vraisemblance devient l'erreur au sens de la norme L^2 entre mesures y^{Test} et prédictions du modèle y . L'avantage de cette formulation est qu'elle prend en compte la connaissance a priori des variables de calibration p . Lorsque les lois de probabilité sont supposées normales, la fonction coût devient:

$$e^2 = \sum_{k=1 \dots N} (y_k^{Test} - y_k(p))^T (\Sigma_{y_k}^{Test})^{-1} (y_k^{Test} - y_k(p)) + (p - p_o)^T (\Sigma_p)^{-1} (p - p_o) \quad (3)$$

où les matrices inverses représentent les matrices de covariance et p_o dénote les valeurs nominales des variables de calibration. La quantité y collecte les réponses qui sont au nombre de deux pour l'application aux impacts de Taylor. La première réponse est le rapport (L/L_o) entre longueurs finales et initiales de l'échantillon. La seconde quantité est le rapport (R/R_o) entre empreintes finales et initiales du bout impacté. La somme de l'équation (3) représente une sommation sur les sept configurations définies en Figure 2.

Table 1– Moyennes et écart-types a priori et a postériori (avant et après calibration).

Variable	A priori	A postériori	Ecart-type (avant)		Ecart-type (après)	
C_0	175.0	102.5	35.0	20.0%	32.9	32.1%
C_1	950.0	954.3	190.0	20.0%	62.7	9.6%
C_3	3.0×10^{-3}	4.1×10^{-3}	0.6×10^{-3}	20.0%	0.6×10^{-3}	14.6%
C_4	8.5×10^{-5}	11.7×10^{-5}	1.7×10^{-5}	20.0%	2.9×10^{-5}	24.8%
C_5	675.0	996.2	135.0	20.0%	22.4	2.2%
N	0.275	0.247	0.055	20.0%	0.021	8.5%

Table 2– Matrice de corrélation a postériori, mise à jour par calibration Bayésienne.

	C_0	C_1	C_3	C_4	C_5	N
C_0	100.0%	-8.3%	37.2%	20.7%	48.8%	26.7%
C_1	-8.3%	100.0%	34.4%	31.1%	8.2%	13.0%
C_3	37.2%	34.4%	100.0%	80.2%	45.3%	-62.1%
C_4	20.7%	31.1%	80.2%	100.0%	27.1%	-46.6%
C_5	48.8%	8.2%	45.3%	27.1%	100.0%	86.0%
N	26.7%	13.0%	-62.1%	-46.6%	86.0%	100.0%

En réalité, la fonction coût (3) est simplement le test statistique du chi-deux qui essaie de rejeter l'hypothèse nulle «les mesures y^{Test} et les prédictions du modèle y sont des échantillons qui proviennent de la même population mère». Une fois la fonction coût e définie, les variables de calibration $p=(C_0;C_1;C_3;C_4;C_5;N)$ sont optimisées afin d'obtenir le plus petit chi-deux possible. Comme les lois de probabilité sont supposées Gaussiennes, un solveur numérique déterministe peut être implémenté. Dans le cas où aucune évidence ne suggère une loi de probabilité particulière, la difficulté est de réaliser l'échantillonnage d'une loi de probabilité a priori inconnue. Cette difficulté peut être résolue grâce à la méthode de *Markov Chain Monte Carlo* (ou l'une de ses nombreuses variantes) capable d'échantillonner une loi de probabilité inconnue [6,7]. Les résultats de la calibration du modèle de Zerilli-Amstrong sont présentés dans les Tables 1 et 2.

4. Quantification de la Qualité Prédictive

La section précédente a présenté une calibration sous incertitude. Cependant, calibrer un modèle n'est qu'une étape plus ou moins utile. La vraie difficulté reste de quantifier la qualité prédictive. Un modèle calibré est susceptible de produire une prédiction de bonne qualité dans le voisinage des configurations qui ont été utilisées pour sa calibration mais la question de sa performance ailleurs reste entière. Dans cette section, la quantification de la qualité prédictive du modèle de plasticité de Zerilli-Amstrong est illustrée.

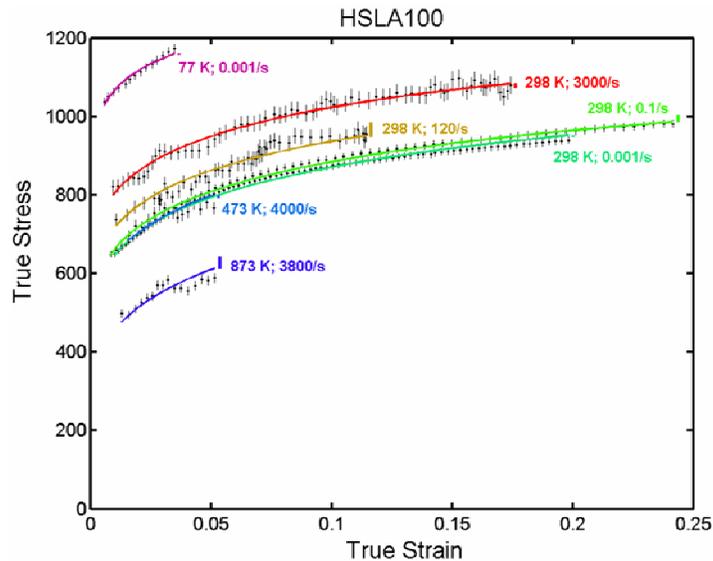


Figure 3 – Modèles de Zerilli-Amstrong et mesures par tests de barre d'Hopkinson.

La Figure 3 montre les résultats de la calibration précédente. Les courbes de contrainte-déformation prédites par le modèle de Zerilli-Amstrong sont comparées à des mesures expérimentales pour différentes conditions de températures T et taux de déformation S_R . Chacune des courbes correspond à l'une des sept configurations illustrées en Figure 2. Les données expérimentales sont issues de modèles identifiés à partir de tests sur barre d'Hopkinson. Les traits verticaux indiquent l'erreur associée à ces mesures. La qualité prédictive du modèle de plasticité est définie comme la distance entre courbes prédites et

données mesurées. La distance de Mahalanobis est choisie afin de mesurer le degré de corrélation entre mesures et prédictions:

$$\varepsilon(T; S_R) = \left(y^{Test} - y(T; S_R) \right)^T \left(\Sigma_y^{Test} \right)^{-1} \left(y^{Test} - y(T; S_R) \right) \quad (4)$$

où y^{Test} représente la moyenne des données mesurées et $y(T; S_R)$ est la courbe de contrainte-déformation prédite par le modèle. La distance de Mahalanobis généralise aux statistiques multi-variables la normalisation standard d'une variable normale à moyenne et écart-type arbitraires en une variable aléatoire normale sans biais et à variance unitaire $N(0;1)$.

Comme les impacts de Taylor sont réalisés pour les sept configurations illustrées en Figure 2, les erreurs de prédiction du modèle peuvent être calculées grâce à l'équation (4) pour ces sept combinaisons de paramètres $(T; S_R)$. Ceci permet de savoir quelle est la qualité prédictive locale mais pas de connaître la performance du modèle pour d'autres configurations qui n'ont pas été testées expérimentalement. Cette difficulté est résolue en développant un modèle de qualité prédictive sur la base des données disponibles. Par simplicité, la famille des modèles polynomiaux est choisie. Une interpolation entre les sept points disponibles est réalisée en lissant plusieurs polynômes. Le modèle qui fournit la meilleure qualité, sans toutefois sur-lisser les données, est le polynôme quadratique:

$$\varepsilon(T; S_R) = 3.56 + 1.72T - 0.32S_R - 2.16TS_R + 2.72T^2 - 2.48S_R^2 \quad (5)$$

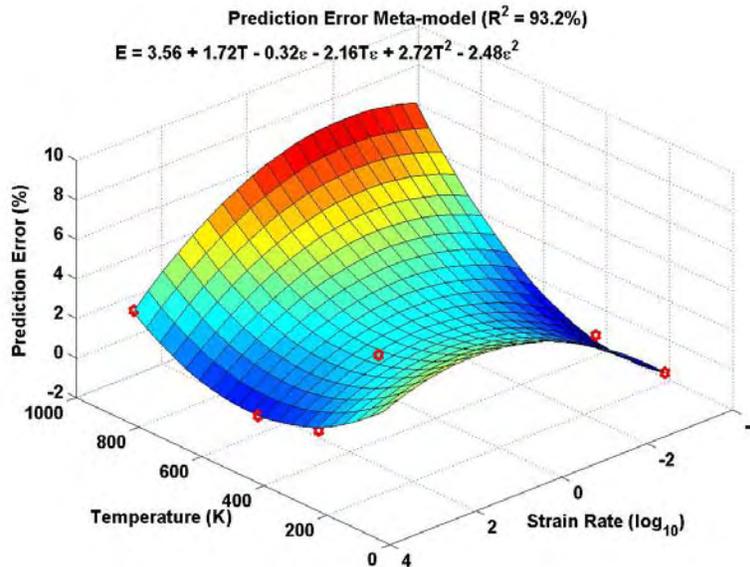


Figure 4 – Qualité prédictive du modèle sur l'ensemble du domaine opérationnel.

La qualité du méta-modèle est indiquée par l'indicateur $R^2 = 93.2\%$, ce qui est jugé suffisant. La procédure de lissage du modèle inclus le développement de statistiques pour chacun des coefficients. Une famille de modèles, dont la moyenne est l'équation (5), est ainsi identifiée. L'échantillonnage des coefficients permet de propager l'incertitude liée à la qualité du lissage ainsi qu'à la forme elle-même du polynôme. Une illustration de la qualité prédictive est présentée en Figure 4 sur l'ensemble du domaine opérationnel.

L'importance de la Figure 4 est qu'elle fournit une estimation de la qualité du modèle de plasticité pour tout le domaine opérationnel, sans même avoir à réaliser une simulation du code de calcul physique. Avec ce résultat, la validation du modèle de plasticité peut être effectuée. Par exemple, la Figure 4 identifie clairement les températures et taux de déformation pour lesquels le modèle ne fournit pas plus de 3% d'erreur de prédiction. Les régions où l'erreur tend à augmenter sont également visibles. Cette information est nécessaire afin de décider, par exemple, des configurations où réaliser des tests physiques supplémentaires pour vérifier ou essayer d'améliorer la qualité prédictive du modèle.

5. Discussion et Perspectives

L'exemple présenté illustre le développement d'un modèle statistique pour estimer la qualité prédictive d'un modèle mathématique ou numérique dans un domaine opérationnel. L'information obtenue peut être utilisée pour répondre à des questions telles que: Quelle est la qualité globale du modèle? Lequel parmi plusieurs modèles potentiels est meilleur? Quelles expériences physiques permettraient d'améliorer la qualité prédictive du modèle?

Les contributions scientifiques de ce travail incluent la propagation d'incertitudes en utilisant des techniques de plan d'expériences, l'analyse de variabilité (c'est-à-dire, l'identification des variables aléatoires qui expliquent une variabilité mesurée ou prédite) ainsi que la quantification de la qualité prédictive des modèles numériques. Les aspects liés à l'analyse de variabilité ne sont pas illustrés dans cette publication mais un exemple est donné dans la Référence [8]. Cette application s'intéresse à la propagation d'un choc explosif au travers d'un assemblage de parties métalliques. L'objectif de cette étude est la prédiction des niveaux d'accélération auxquels des composants électroniques d'un système d'armement sont soumis. Le modèle développé à ce jour compte plus de six millions de degrés de liberté, deux millions d'éléments finis, plusieurs centaines de surfaces de contact ainsi que douze variables aléatoires. Son analyse nécessite quatre heures en utilisant plus de 500 processeurs de calcul, ce qui limite sérieusement le nombre d'analyses qui peuvent être réalisées. Des plans d'expériences et analyses de sensibilité permettent de sélectionner un petit nombre de calculs et d'identifier lesquelles parmi les douze variables aléatoires sont responsables de la variabilité observée.

Plusieurs aspects essentiels ont été volontairement laissés de côté dans cette discussion, pour raison de simplicité. Tout d'abord, il n'est généralement pas possible de définir une erreur de modélisation sans réaliser au préalable une comparaison calculs-essais. Les incertitudes ainsi quantifiées ne sont cependant pas restreintes à l'erreur de modélisation. Elles incluent la variabilité de l'environnement, les erreurs de mesure, les incertitudes introduites par la convergence des maillages, les erreurs des solveurs numériques, etc. Bien que n'étant pas discutés ici, chacun de ces aspects doit faire l'objet d'une étude indépendante, ce qui est en cours à Los Alamos pour plusieurs applications.

Le second aspect ignoré concerne l'établissement d'intervalles de confiance pour le méta-modèle statistique de qualité prédictive. Lors du développement du méta-modèle, de nombreux choix quelque peu arbitraires sont réalisés. Ceux-ci incluent, par exemple, l'hypothèse de lois de probabilités Gaussiennes ainsi que la forme elle-même du modèle. En toute rigueur, l'incertitude associée à ces hypothèses devrait être quantifiée et propagée à travers l'analyse afin de quantifier la variabilité associée à l'erreur de prédiction. Une difficulté est que l'incertitude liée aux choix de modélisation ne peut généralement pas être décrite par la théorie des probabilités. Cette difficulté est en cours d'investigation.

En dernier lieu, il est important de reconnaître que l'objectif des simulations et expériences est de supporter la prise de décision. Bien que des simulations et expériences de plus en plus précises soient possibles, des limites existeront toujours quant à ce qui peut être simulé numériquement ou mesuré expérimentalement. Le mécanisme de prise de décision doit donc être le plus robuste possible vis-à-vis des «incertitudes inconnues», c'est-à-dire des sources d'incertitude et de variabilité qui ne peuvent pas être modélisées. Des théories non-probabilistes, telles que la théorie du manque d'information, sont en cours d'évaluation pour formaliser le processus de prise de décision pour certaines applications où de nombreuses incertitudes ne peuvent pas être résolues par davantage de simulations numériques ou mesures expérimentales [9, 10].

6. Remerciements

L'auteur est reconnaissant au programme ASCI (*Advanced Scientific Computing*) pour la Vérification et Validation en ingénierie pour son support. L'assistance de Kenneth M. Hanson, du groupe des méthodes scientifiques à Los Alamos, est également fortement appréciée. Los Alamos National Laboratory est opéré par l'Université de Californie pour le compte du Département de l'Energie, sous le contrat numéro W-7405-ENG-36.

7. Références

- [1] Doebling, S.W., "Structural Dynamics Model Validation: Pushing the Envelope," *International Conference on Structural Dynamics Modelling: Test, Analysis, Correlation and Validation*, Madeira, Portugal, 3-5 Juin 2002.
- [2] Adessio, F.L., Johnson, J.N., Maudlin, P.J., "The Effect of Void Growth on Taylor Cylinder Impact Experiments," *Journal of Applied Physics*, Vol. 73, No. 11, Juin 1993, pp. 7288-7297.
- [3] **HKS/Abaqus™ Explicit User's Manual**, Version 5.8, Hibbitt, Karlsson & Sorensen, Pawtucket, RI, 1998.
- [4] Zerilli, F.J., Amstrong, R.W., "Dislocation Mechanics-based Constitutive Relations for Material Dynamics Calculations," *Journal of Applied Physics*, Vol. 61, No. 5, Mars 1987, pp. 1816-1825.
- [5] Hanson, K.M., "A Framework for Assessing Uncertainties in Simulation Predictions," *Physica D*, Vol. 133, 1999, pp.179-188.
- [6] Carlin, B.P., Chib, S., "Bayesian Model Choice via Markov Chain Monte Carlo," *Journal of the Royal Statistical Society Series B*, Vol. 77, 1995, pp. 473-484.
- [7] Kerschen, G., Golinval, J.-C., Hemez, F.M., "Bayesian Model Screening for the Identification of Non-linear Mechanical Structures," *Journal of Vibration and Acoustics*, Janvier 2003, accepté pour publication.
- [8] Cundy, A.L., Schultze, J.F., Hemez, F.M., Doebling, S.W., Bingham, D., "Variable Screening in Metamodel Design for a Large Structural Dynamics Simulation," *20th SEM International Modal Analysis Conference*, Los Angeles, CA, 4-7 Février 2002.
- [9] Ben-Haim, Y., **Information-Gap Decision Theory: Decisions Under Severe Uncertainty**, *Series on Decision and Risk*, Academic Press Publishers, 2001.
- [10] Hemez, F.M., Ben-Haim, Y., "Information-gap Robustness for the Test-analysis Correlation of a Non-linear Transient Simulation," *9th AIAA/ISSMO Symposium on Multi-disciplinary Analysis and Optimization*, Atlanta, GA, 4-6 Septembre 2002.